

# Типы химической связи

$$\{\hat{T}_N + U_n(R)\} \Phi_n(R) = E \Phi_n(R)$$

Минимум потенциала  $U_n(R)$   
определяет химическую связь.

## 1. Ионная связь

На больших расстояниях – притяжение разноименно заряженных ионов.

На малых расстояниях – отталкивание заполненных оболочек (принцип Паули).

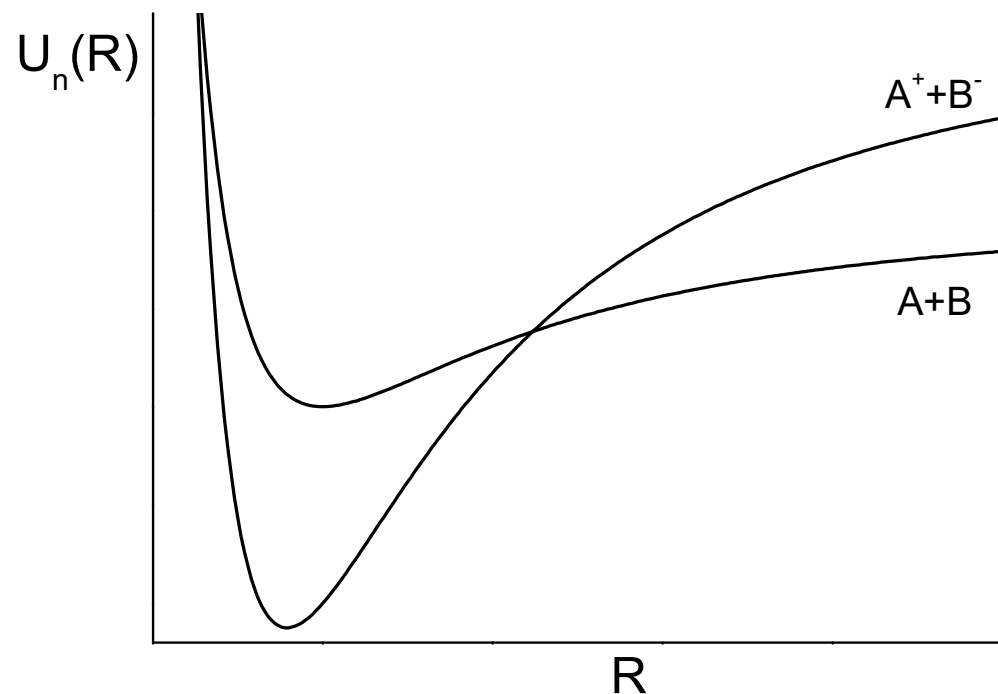
Типичный пример: NaCl

Характерная энергия  $E \sim 8-10$  эВ

Характерное расстояние  $R \sim 2-3$  Å

При формировании ионных кристаллов переходных металлов (Fe, Cu) происходит гибридизация d-оболочек.

Ионные кристаллы – обычно диэлектрики.



Электронная конфигурация при ионной связи  
– суперпозиция нейтрального и ионного состояний

# Типы химической связи

## 2. Ковалентная связь

Механизм: кулоновское + обменное взаимодействие

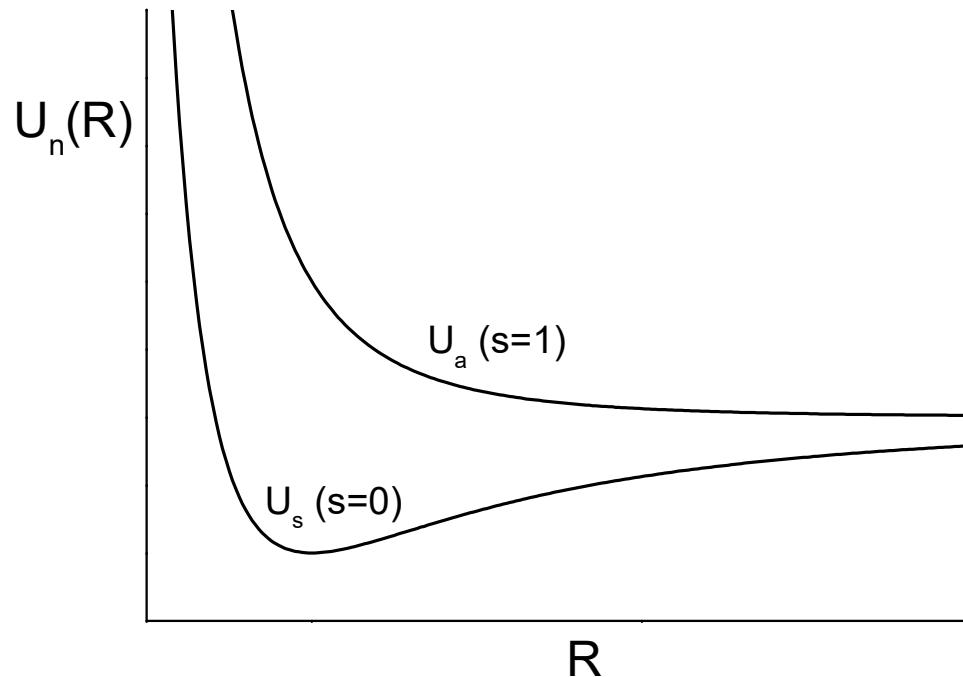
Молекула водорода:  
возможность образования  
ковалентной связи  
зависит от симметрии ВФ  
и спина электронов.

$$\psi_a(r_1, r_2) = \{\varphi_1(r_1)\varphi_2(r_2) - \varphi_1(r_2)\varphi_2(r_1)\} \chi_s(s_1, s_2)$$

(уменьшение электронной плотности между ядрами)

$$\psi_s(r_1, r_2) = \{\varphi_1(r_1)\varphi_2(r_2) + \varphi_1(r_2)\varphi_2(r_1)\} \chi_a(s_1, s_2)$$

(увеличение электронной плотности между ядрами)



Типичный пример ковалентных кристаллов – кристаллы элементов IV группы таблицы Менделеева. Часто это полупроводники.

Углерод

В алмазе –  $sp^3$ -гибридизация:  
4 равноправные связи.

В графите –  $sp^2$ -гибридизация:  
3 равноправные связи в плоскости.

Характерная энергия  $E \sim 5-10$  эВ

### 3. Металлическая связь

Свободные электроны проводимости находятся в делокализованном состоянии.

Щелочные металлы: почти точечные ионы погружены в электронную жидкость.  
Металлы переходных групп: из-за d-оболочек ионы нельзя считать точечными, поэтому электронная плотность более неоднородна.

Благодаря отсутствию выделенных связей металлы намного пластичнее хрупких ковалентных кристаллов.

Характерная энергия  $E \sim 1$  эВ

### 4. Водородная связь

Атом водорода отдает единственный электрон.  
Точечный протон обеспечивает связь между двумя отрицательными ионами.

Пример: кристалл льда.

Характерная энергия  $E \sim 0.1$  эВ

## 5. Ван-дер-ваальсова связь

Связь между нейтральными атомами и молекулами.

Механизм: флуктуирующий дипольный момент.

$$d_1 \Rightarrow E \sim \frac{d_1}{R^3} \Rightarrow d_2 \sim \chi E \sim \chi \frac{d_1}{R^3}$$

$$\langle d_1 \rangle = 0$$

$$E \sim \frac{d_1 d_2}{R^3} \sim \chi \frac{d_1^2}{R^6}$$

$$\langle E \rangle \sim \chi \frac{\langle d_1^2 \rangle}{R^6} \quad - \text{ взаимодействие Лондона}$$

Примеры:

молекулярные кристаллы;

кристаллы благородных газов

На малых расстояниях –

- отталкивание оболочек:

потенциал Леннарда-Джонса:

$$U(R) = U_0 \left[ \left( \frac{R_0}{R} \right)^{12} - \left( \frac{R_0}{R} \right)^6 \right]$$

Характерная энергия  $U_0 \sim 0.01$  эВ

Характерные расстояния  $R_0 \sim (3-4)a_0$